

Функционал	Базис	a, Å	c, Å	V, Å	Погрешность, %
b3lyp	***	10,5519	7,5471	727,729	0,37
	STO-3G	10,2588	7,3939	673,900	9,08
b3lyp-d3	***	10,3661	7,4097	689,538	6,46
	STO-3G	10,1323	7,3097	649,902	13,44
	STO-6G	10,1079	7,3060	646,449	14,08
pbe	***	10,5217	7,5299	721,929	1,22
	STO-3G	10,3291	7,4445	687,845	6,67
pbe-d3	***	10,5367	7,4227	698,776	4,83
	STO-3G	10,2548	7,3943	673,422	9,16

Погрешность рассчитывалась как среднеквадратичное отклонение по параметрам кристаллической решетки и объему элементарной ячейки [4]:  $a = 10,5547 \text{ Å}$ ,  $c = 7,5644 \text{ Å}$ ,  $V = 729,788 \text{ Å}^3$ . При использовании базиса STO-6G расчеты приводят к ошибке из-за малых расстояний между соседними атомами, поэтому в таблице приведен только один получившийся расчет с этим базисом. Очевидно, пара b3lyp-d3 и STO-6G дает наибольшую погрешность по сравнению с экспериментом. Наиболее удачными оказались b3lyp и \*\*\*, а также pbe и \*\*\*. Первый метод мы будем использовать для расчета структур кристаллогидратов, как более точный. Второй же подойдет для изучения механических, тепловых и электронных свойств, т.к. оптимален и по точности, и по скорости расчетов.

Таким образом, в результате перебора разных сочетаний функционалов и базисных наборов определены два оптимальных метода вычислений для кристаллогидратов в рамках программного пакета CRYSTAL17. Погрешность по сравнению с экспериментом составила всего 0,37 % для функционала b3lyp и 1,22 % для функционала pbe, базисный набор в обоих случаях был взят из библиотеки базисов для каждого химического элемента: Ca\_86-511d3G\_catti\_1991, C\_6-31d1G\_gatti\_1994, O\_6-31d1\_gatti\_1994 и H\_3-1p1G\_gatti\_1994. Следующим шагом будет проведение квантовомеханического исследования структуры и различных физических свойств перспективных кристаллогидратов.

Список публикаций:

- [1] Глинка Н.Л. *Общая химия: учебное пособие для вузов* // М.: Интеграл-Пресс. 2003. 728с.
- [2] Глебова Л.В., Медникова О.Л. *Методы борьбы с гидратообразованием* // Геология, география и глобальная энергетика. 2014. №3(54). С.71-73.
- [3] Вершинин С.Н. *Кристаллогидраты неорганических солей как охлаждающие элементы дыхательной смеси в шахтовых самоспасателях* // Энергетическая безопасность Новые подходы к развитию угольной промышленности. 2012. С.60-62.
- [4] Swainson I.P. *The structure of monohydrocalcite and the phase composition of the beachrock deposits of Lake Butler and Lake Fellmongery, South Australia* / I.P. Swainson // American Mineralogist. 2008. V.93. P. 1014 – 1018
- [5] Бызова Е.С. Молекула H<sub>2</sub>O с точки зрения симметрии/ Е.С. Бызова, Ю.Н. Журавлев // ВХКСФ-25, материалы конференции. 2019. С.48-49.
- [6] Dovesi R. *CRYSTAL17 User's Manual* / R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti // Torino: University of Torino. 2017.
- [7] Шайкомалова Е.С. Структура и свойства фазовых состояний льда/ Е.С. Шайкомалова (Бызова), Ю.Н. Журавлев// Журнал структурной химии. 2019. Т.60, №1. С.64-70.
- [8] CRYSTAL – Basis Sets Library [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.crystal.unito.it/basis-sets.php>. (Дата обращения: 22.12.2019).

## Оптические свойства прозрачной керамики MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> облученной ионами меди

**Ваганов Александр Шамилевич<sup>1</sup>**

**Киряков Арсений Николаевич<sup>1</sup>, Шапова Юлия Владимировна<sup>1,2</sup> Гольева Е.В.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет

<sup>2</sup>Институт геологии и геохимии УрО РАН

<sup>3</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

Зацепин Анатолий Федорович<sup>1</sup>, к.т.н.

[Alexander1705q@icloud.com](mailto:Alexander1705q@icloud.com)

Керамики алюмо-магниевого шпинели (АМШ) являются перспективным оптическим материалом, для устройств оптоэлектроники и фотоники [1]. Высокая химическая, механическая, а также радиационная стойкость позволяет проводить ионную имплантацию таких керамик повышенными дозами. В результате ионной имплантации в матрице шпинели формируются как собственные дефекты анионной и катионных подрешеток, так и примесные дефекты, связанные с типом имплантируемых ионов. При этом происходит модификация керамики новыми оптически-активными центрами. Цель данной работы заключается в исследовании оптических свойств керамики АМШ до и после ионной имплантации Cu<sup>2+</sup>.

Микрокристаллические образцы прозрачной АМШ получены из Санкт-Петербургского университета имени Петра Великого. Аттестация образцов проводилась методами СЭМ и РФА. Образцы содержат 100% фазы  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  пространственная группа  $\text{Fd}\bar{3}m$ . Размер зерен составляет 5-15 мкм. Спектры оптического поглощения измерены на спектрофотометре Lambda 35 (Perkin Elmer), спектры фотолюминесценции записаны с помощью CCD камеры рамановского спектрометра Horiba (Jobin Yvon) при возбуждении лазером с энергией 2,53 эВ. Легирование ионами  $\text{Cu}^{2+}$  выполнено в атмосфере аргона с флюенсом  $1 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ . Ускоряющее напряжение ионов составляло 30 кВ, время импульса 0.4 мс, ток разряда 60 А. Отжиг имплантированных керамик выполнен в диапазоне температур от 100 до 530 °С с шагом 30 °С.

На спектрах оптического поглощения (рис.1) видны полосы, характерные для поверхностного плазмонного резонанса (ППР) наночастиц меди – 2.1 эВ. При низких температурах отжига ППР имеет два пика поглощения, что показывает несферичность (эллипсоидальность) синтезируемых плазмонных наночастиц [2]. С увеличением температуры отжига максимумы поглощения сливаются и смещаются в низкоэнергетическую часть спектра, что свидетельствует об укрупнении и окислении наночастиц меди.

Интенсивность люминесценции микропримесей  $\text{Mn}^{2+}$  и  $\text{Cr}^{3+}$  падает в результате ионной имплантации, что обусловлено формированием дополнительных собственных дефектов в матрице шпинели. Кроме того, в облученных образцах регистрируются новые полосы в диапазоне 550-680 нм, инициированные  $\text{Cu}^{2+}$  ионной имплантацией.

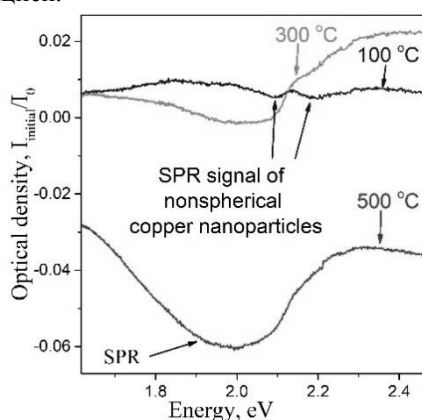


рис.1. Спектры оптического поглощения при различных температурах отжига, нормированные на спектр не отожжённого образца

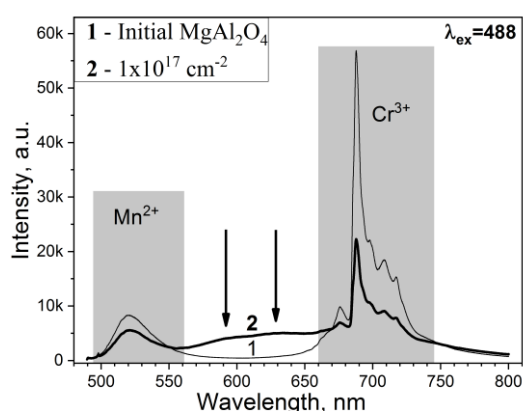


рис. 2. Спектры фотолюминесценции до и после облучения. Стрелками указаны максимумы новых люминесцентных центров

Таким образом, показано, что при ионной имплантации  $\text{Cu}^{2+}$  керамики АМШ новые оптически-активные центры, обусловленные формированием несферических металлических наночастиц меди, в приповерхностном слое. Кроме того, в матрице шпинели формируются новые центры люминесценции, связанные с присутствием меди.

Список публикаций:

- [1] M. Rubat du Merac, H. J. Kleebe, M. M. Müller & I. E. Reimanis, *J Am Ceram Soc*, 96(11), 3341-3365 (2013).
- [2] Li M., Cushing S.K., Wu N., *Analyst*, 140, 386-406, (2015)

## Диэлектрические свойства трехкомпонентных твердых растворов состава $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ при высоких температурах

**Волков Дмитрий Вячеславович**

Вербенко Илья Александрович, Глазунова Екатерина Викторовна, Шилкина Лидия Александровна

Южный федеральный университет

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.

[werhider@yandex.ru](mailto:werhider@yandex.ru)

В последние годы внимание многих исследователей сосредоточено на группе твердотельных сред, названных мультиферроиками. Манганит висмута ( $\text{BiMnO}_3$ ) — представитель этой группы с температурами сегнетоэлектрического фазового перехода (ФП) 760 К, и ферромагнитного ФП — 105 К, проявляет магнитодиэлектрический эффект, но весьма слабый, из-за большого различия в значениях указанных температур. С целью получения беспримесной керамики  $\text{BiMnO}_3$  прибегли к частичному-замещению  $\text{Bi}^{3+}$  на